

Documento de Área – Física Atômica e Molecular

1. Estado da Arte

1.1. Considerações gerais sobre o desenvolvimento e estado atual

A Física Atômica e Molecular é uma área fundamental da física moderna e tem participado dos seus mais importantes avanços. Já no final do séc. XIX colocou na pauta de preocupações da Física a questão da compreensão do espectro de emissão do átomo de hidrogênio, em particular a série de Balmer, que consiste de emissões de radiação eletromagnética localizadas na parte visível do espectro. Durante o desenvolvimento da mecânica quântica na primeira metade do séc. XX esse problema foi parcialmente resolvido por Niels Bohr e posteriormente foi o primeiro teste de aplicação da nova mecânica quântica representada pela equação de Schrödinger. Embora a explicação de Bohr possa ser considerada incompleta (não explica as intensidades das linhas espectrais, por exemplo), alguns postulados se mostraram perenes e fundamentais. Certamente esse é o caso da relação entre a diferença de energia entre dois níveis e o comprimento de onda da radiação eletromagnética emitida (ou absorvida). Essa é a essência da espectroscopia. Os conhecimentos adquiridos nesse período serviram como uma base fundamental para a qualificação e aceitação da equação de Schrödinger e ajudaram a valorizar a área de espectroscopia atômica. Naturalmente essas preocupações foram ampliadas para sistemas moleculares. Entretanto sistemas moleculares são mais ricos espectroscopicamente pois além de eletronicamente serem mais complexos, incluem também espectroscopia rotacional (na região de micro-ondas) e espectroscopia vibracional (na região de infravermelho). Importantes estudos experimentais realizados na área correlata de química ajudaram a ampliação da área nessa direção. Essa é uma característica muito importante da área de Física Atômica e Molecular, sua multidisciplinaridade. Sistemas moleculares são hoje de interesse também em Química, Bioquímica, Farmácia, etc. De forma correlata, sistemas atômicos são o foco de interesse em ótica quântica, átomos frios, antimatéria, condensados de Bose-Einstein, etc.

O desenvolvimento da área de Física Atômica e Molecular é fortemente dependente e influenciado por avanços na parte experimental e na parte computacional. Uma vertente

teórica significativa envolve a solução aproximada, e cada vez mais precisa, da equação de Schrödinger para sistemas cada vez mais complexos. No início houve uma forte relação entre essa área e a Física Nuclear. Um exemplo evidente disso é o modelo de camadas (*shell model*) que, similar ao modelo de configuração dos elétrons em um átomo ou molécula, determina como os prótons e neutrons se arranjam em um núcleo. Mas também importantes conceitos, métodos e teoremas foram compartilhados por essas duas áreas (por exemplo o Teorema de *linked cluster* de Brueckner e Goldstone, é a base das teorias perturbativas utilizadas constantemente para átomos e moléculas). Diante da dificuldade em se resolver a equação de Schrödinger para sistemas realistas, o desenvolvimento de códigos computacionais tem sido uma preocupação constante. Foi em meados dos anos de 1960 que importantes avanços em algoritmos e técnicas, aliados a um crescente – e posteriormente revolucionário - desenvolvimento de recursos computacionais, tanto em *hardware* quanto em *software*, levaram a uma área teórica intermediária entre a Física e Química, chamada de Química Quântica. No Brasil essa área começou no início da década de 1970 com iniciativas pioneiras, notadamente no Rio de Janeiro, São Paulo, Belo Horizonte, Recife e Brasília apresentando um desenvolvimento mais pronunciado a partir dos anos de 1980. Uma marca da presença e desenvolvimento dessa área temática no país tem sido o Simpósio Brasileiro de Química Teórica, realizado bienalmente desde 1981 e que congrega cerca de 400 participantes, sendo cerca de 350 participantes brasileiros, distribuídos em todas as regiões do Brasil. Uma outra iniciativa foi a Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, criada em 1987, que tem contribuído principalmente com a formação e motivação de novos pesquisadores nessa área. Outros eventos científicos que ocorrem no Brasil e também já estão consolidados nessa área são: o Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, a Escola de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos e o Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular. O marcante desenvolvimento da química quântica e da área de estrutura eletrônica de materiais levou ao Prêmio Nobel de Química compartilhado entre John Pople e Walter Kohn, em 1998.

A natural aproximação com a Química e a Bioquímica tem levado a outras preocupações que se refletem no amplo desenvolvimento recente de simulações computacionais (Monte Carlo e Dinâmica Molecular). Isso serve também como aproximação da área com outra importante e muito ativa no Brasil que é a área de Física

Estatística (veja Documento de Área Física Estatística e Computacional). Ela permite o estudo de átomos e moléculas interagindo com um meio líquido. Assim, nota-se imediatamente a importância com os problemas centrais de espectroscopia molecular em química e bioquímica. As configurações geradas pela simulação são representativas do líquido na condição termodinâmica usada. Líquidos têm sido considerados em amplas condições termodinâmicas, desde temperaturas muito baixas até condições supercríticas. Nesse último caso nota-se uma priorização de água supercrítica e também de dióxido de carbono, que em condições supercríticas é muito usado na indústria. Essa é uma área com importante participação brasileira, tanto de físicos como de químicos e bioquímicos teóricos e tende a crescer vigorosamente nos próximos anos. Internacionalmente, cresce também a aplicação e desenvolvimento desses métodos para estudos tanto de espectroscopia e reatividade molecular quanto de estruturas de biomoléculas. Notadamente, a área de estrutura de proteínas e reações em enzimas tem crescido bastante. Mais recentemente os estudos de lipídeos, membranas e carboidratos também têm merecido mais atenção. Importantes grupos – tanto na Física e na Química como na Biologia - nessa área de simulações com aplicações biológicas se encontram em Recife, Vitória, São Carlos, Campinas, São Paulo, Rio de Janeiro e Porto Alegre, entre outros. Estudos com ênfase nos aspectos quânticos, mesmo de sistemas biomoleculares, são amplamente difundidos no Brasil envolvendo grupos em quase todas as grandes universidades e regiões do Brasil (Manaus, Belém, Fortaleza, Recife, Maceió, Salvador, Brasília, Goiânia, Rio de Janeiro, Niterói, Belo Horizonte, São Paulo, Campinas, São Carlos, Porto Alegre, Juiz de Fora, São João Del Rei, São José dos Campos, Curitiba, entre muitos outros).

A parte experimental da área tem crescido e participado de importantes desenvolvimentos recentes como a produção de átomos frios, condensados de Bose-Einstein e também a espectroscopia tradicional realizada em condições singulares oferecidas pelo Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. Em grande aproximação com a Ótica (veja Documento de Área da Ótica) nota-se importantes desenvolvimentos dessa área em Recife, Rio de Janeiro, Belo Horizonte, Campinas, São Carlos, São Paulo, entre outros.

A participação experimental na área tem mostrado competência para acompanhar e avançar os importantes desenvolvimentos realizados internacionalmente. O número de participantes experimentais no Brasil ainda está abaixo da média desejável (que tende a ser

em torno de 60%) quando comparado aos países mais avançados cientificamente, mas tem crescido bastante em qualidade e diversidade nas últimas décadas.

Sendo uma área fortemente influenciada pelo desenvolvimento experimental é natural que haja uma necessidade maior de fortalecer grupos experimentais. Alguns experimentos recentes, como a espectroscopia de femtosegundo (que deu o Prêmio Nobel de Química a Ahmed Zewail em 1999) e a obtenção, em 1995, setenta anos após sua previsão, dos condensados de Bose-Einstein (que deu o Prêmio Nobel de Física a Eric Cornell, Carl Wieman e Wolfgang Ketterle em 2001) usando gás atômico de ^{87}Rb são dois exemplos dignos de menção. Um permite analisar reações químicas na escala de tempo dos núcleos e o outro mostra uma relação muito detalhada de sistemas atômicos agindo quânticamente numa escala grande e em temperaturas da ordem de nano-kelvin. A obtenção do condensado é um exemplo do desenvolvimento de técnicas experimentais de alto nível, o que nesse caso envolve resfriamento por laser e por evaporação (*laser cooling* e *evaporative cooling*). De fato 4 anos antes, em 1997, Steven Chu, C. Cohen-Tannoudji e William Phillips ganharam o Prêmio Nobel de Física, pelo desenvolvimento de métodos para resfriar e armadilhar átomos usando luz de laser. Manipulação quântica de átomos é uma área muito ativa no país com diversos grupos atuantes. Sistemas atômicos e moleculares são de importância central também em informação e ótica quânticas. Existe também um esforço intenso na busca pela antimatéria em forma atômica e molecular.

Deve também ser mencionado o desenvolvimento de técnicas instrumentais que ocorre paralelo ao desenvolvimento para a obtenção de novos resultados.

Os primeiros espectrômetros para estes fins foram construídos no país no início da década de 1970. Vários tipos de experiências foram então introduzidas pela primeira vez no país, quando se criou a tradição em várias subáreas da física atômica e molecular, de desenvolvimento da própria aparelhagem, devido ao custo e versatilidade proporcionada para estudos de fenômenos físicos de interesse. Esta tradição foi continuada pelos grupos que se formaram a partir dos laboratórios pioneiros. Esta evolução, em parte, coincide com o desenvolvimento mundial da área. Nos primeiros espectrômetros construídos, constatou-se que uma melhor resolução espectroscópica era conseguida utilizando uma ótica de partículas carregadas eficiente e condições de alto vácuo, livre de impurezas. Em virtude dos avanços tecnológicos ocorridos no final da década de 60, na tecnologia de vácuo, com a

introdução, por exemplo, das bombas turbomoleculares que proporcionam rapidamente condições de alto vácuo, livre de impurezas. Houve também destacados avanços computacionais, com a disseminação dos computadores pessoais, que levou ao surgimento dos primeiros softwares. Esses possibilitaram aos laboratórios cálculos de propriedades de lentes eletrostáticas para o eficiente transporte, aceleração e desaceleração de partículas carregadas através de seus espectrômetros. Aparelhos mais sofisticados e eficazes começaram a ser construídos, levando a um considerável avanço na área, incentivando até mesmo a comunidade mundial a revisitar uma variedade de estudos de colisão de partículas.

Hoje, os estudos experimentais realizados no Brasil usam técnicas de espectroscopia por absorção de luz ou espalhamento envolvendo espectroscopia por perda de energia de elétrons, incluindo espectroscopia fotoeletrônica, que são realizados por ativos grupos no Rio de Janeiro, Juiz de Fora, Campinas, Brasília, Niteroi, entre outros. Entre diversos processos de colisão estudados se encontram fragmentação e também a formação de agregados de íons. Íons também estão envolvidos nos estudos de física de superfície e espectrometria de massa. Adicionalmente, estuda-se a física de colisões atômicas com íons pesados e a ionização de elétrons em camadas internas, além de obtenção de seções de choque para perda e captura de elétrons, multi-ionizações etc. Resultados obtidos por esses laboratórios tem se mostrado importantes e servido também para uma interação saudável entre grupos teóricos e experimentais. Exemplo disso tem sido encontrado pelos grupos que estudam espalhamento de luz, elétrons e pósitrons em Curitiba, São Carlos, Campinas, Brasília, Rio de Janeiro, Florianópolis, Belo Horizonte, São José dos Campos, Salvador, etc.

Espera-se para os próximos anos o desenvolvimento ainda maior dessas sub-áreas mencionadas e é possível notar uma crescente preocupação com o estudo de sistemas moleculares em estados excitados.

1.2. Desafios e perspectivas

Analisando-se o desenvolvimento da área nos últimos 5 anos nota-se um grande amadurecimento recente da área e uma maior inserção internacional. Isso se nota também com a participação de vários pesquisadores em comitês científicos, corpo editorial de

revistas internacionais, participação em conferências internacionais com relativo destaque. Isso tem sido acompanhado por um saudável rejuvenescimento dos pesquisadores, o que se deve em parte às contratações realizadas nas universidades brasileiras nos últimos 5 anos. Como consequência, tem sido possível uma maior ousadia e participação em projetos de grande relevância. Existem vários projetos relacionados com outras áreas do conhecimento, como Ótica, Física Estatística, Ciência dos Materiais, Química, Bioquímica, Farmácia, Astrofísica e Cosmologia, etc. Em cada uma, relevantes problemas em aberto são encontrados. São desafios importantes a compreensão da reatividade de biomoléculas, dinâmica de estados excitados, estudos de marcadores biológicos, desenvolvimento e *design* de novas drogas medicamentosas, desenvolvimento de sensores, em várias fases da matéria, compreensão de átomos e moléculas exóticas, etc. Algum esforço já existe para o estudo de caos em física atômica e molecular.

Foi anunciada recentemente a detecção de núcleos de anti- ${}^4\text{He}$, anti-partícula mais pesada já detectada, o que pode levar a estudo teóricos e experimentais de moléculas altamente exóticas, formadas de antimatéria. O “desaparecimento” da antimatéria no Universo é um enigma fascinante da cosmologia, em permanente discussão. A produção de antimatéria em programas como o ATHENA-CERN, se dá em nível atômico, antihidrogênio, visando testar o Teorema CPT. A existência da “molécula” hidrogênio-antihidrogênio é constantemente especulada. Outros sistemas exóticos como as moléculas muônicas e positrônicas estabelecem uma ponte entre a Física Atômica e Molecular, a Física Nuclear e a Física de Partículas. Uma importante fonte de informações em Astrofísica são espectros de alta resolução de moléculas particulares; por exemplo, informações sobre a abundância de deutério no Universo. Na área de rádio-astronomia a identificação de novas espécies moleculares no espaço interestelar é feita através da análise do espectro rotacional.

Deve ser ressaltado que existe a participação brasileira na maioria desses temas relevantes, mas espera-se um maior desenvolvimento multidisciplinar, uma das mais importantes características dessa área.

Para a abordagem teórica desses temas certamente será necessário o desenvolvimento de recursos computacionais, além de novas metodologias e algoritmos.

Com a crescente necessidade de se estudar sistemas moleculares cada vez maiores (biomoléculas) espera-se que métodos semi-empíricos continuem sendo de importância. A espectroscopia de porfirinas, clorofilas e ftalocianinas deve se tornar ainda mais importante diante da crescente pressão pelo entendimento dos processos moleculares do meio ambiente. Assim, é também possível o aumento de estudos de moléculas relacionadas a diversos aspectos do meio ambiente, incluindo os processos físico-químicos do aquecimento global e dos ciclos do dióxido de carbono e do oxigênio. Do lado experimental esperam-se desenvolvimentos importantes na área de espectroscopia de absorção multifotônica, o que será um interessante desafio para os estudos teóricos. Adicionalmente, os estudos de cinética de reações, resfriamento e aprisionamento de átomos, sistemas diluídos (átomos em baixa densidade e baixa temperatura, como no caso de Condensados) continua muito ativo. Espectroscopia de átomos frios continua sendo de grande interesse.

1.3. Brasil na área

A pesquisa em Física Atômica e Molecular no país se dá essencialmente nas universidades e está disseminada em todas as regiões. Apenas cinco estados da federação não apresentam grupos de pesquisa nessa área, mas alguns já mostram possibilidades e interesse no tema.

Diversos pesquisadores são cadastrados em mais de uma área e de fato trabalham em diferentes, porém correlatas, áreas como Ótica, Física da Matéria Condensada, Física Estatística e Computacional, etc. Isso faz com que os bancos de dados mostrem uma certa imprecisão. Adicionalmente, a análise dos diretórios de grupos do CNPq mostrou a inexistência de alguns grupos importantes e conhecidos. Assim a distribuição de pesquisadores da área será feita aqui apenas de forma percentual, comparando as diferentes regiões do país. Esses números foram obtidos através de uma análise adicional dos pesquisadores cadastrados pela SBF na área (cada pesquisador pode participar de mais uma área) e pelas participações em algumas das mais importantes reuniões do país. Eles são então mostrados na tabela a seguir e devem ser olhados apenas de forma aproximada. Ainda assim os resultados permitem detectar os aspectos que serão discutidos em seguida.

Tabela: Estimativa da distribuição regional dos pesquisadores na área.

Região	Pesquisadores (%)	Participação no ENFMC (2010) (%)
Norte AM, PA, AP, AC, RO, RR	4	4
Nordeste MA, PI, CE, RN, PB, PE, AL, SE, BA	9	22
Sudeste MG, SP, RJ, ES	64	57
Centro-Oeste DF, GO, TO, MS, MT	11	8
Sul PR, SC, RS	12	9

Um aspecto interessante é que a participação da região Centro-Oeste é semelhante à participação da região Sul do país, mais tradicional como centro de pesquisas. Esse fato decorre da concentração conhecida de pesquisadores na região de Brasília, um conhecido polo na área. Ademais, nota-se um vigor crescente na região de Goiás. A região Norte mostra uma baixa densidade, mas que não é característica da área, sendo notada também nas outras áreas de Física. Por outro lado, parece que no Nordeste existe uma baixa concentração relativa. Em parte, isso é normalmente nivelado quando se considera a participação de pesquisadores em departamentos de química. Mas considerando a Física Atômica e Molecular *per se* nota-se uma menor concentração de físicos na região Nordeste. Essa condição pode estar em vias de mudança com o aparecimento de novos grupos em Fortaleza (UFC), Natal (UFRN), Maceió (UFAL), Salvador (UFBA), Ilhéus (UESC) e Teresina (UFPI). Nesse último caso (UFPI) parece existir maior ênfase experimental. Novos pesquisadores da área foram recentemente contratados no campus de

Marabá da UFPA e na Universidade Federal da Integração Latino-Americana (UNILA), em Foz do Iguaçu, criando condições para que germinem grupos em outras localidades.

Pesquisadores teóricos se distribuem por todas as regiões mas o mesmo não ocorre com a parte experimental. Nesse caso, existe uma grande concentração no Sudeste, com fortes grupos no Rio de Janeiro, Minas Gerais e São Paulo. Mas nesses estados há uma boa diversidade, ocorrendo em diferentes instituições no mesmo estado. O Rio de Janeiro apresenta grupos nas mais importantes instituições da cidade do Rio e também em Niterói. Minas Gerais, tem grupos também em Juiz de Fora e São João Del Rei. Já no estado de São Paulo, existe uma ampla diversificação, envolvendo as principais Universidades, como USP, UNICAMP e UNESP. Fora desse eixo também existem grupos experimentais atuantes em Florianópolis, São José dos Campos, Curitiba, Recife, João Pessoa etc.

Mas um ponto importante a ser mencionado é a pouca ênfase que tem sido dada, à consolidação das técnicas de espectroscopia ótica de alta resolução no país. O número de laboratórios de pesquisa em Física Atômica e Molecular que usam técnicas de absorção, emissão, Raman, multifótons, espectroscopia laser em alta resolução é muito reduzido. A formação de pesquisadores nestas áreas tem sido insuficiente. Isso é particularmente sério quando se nota que recentes descobertas e desenvolvimentos importantes (citados anteriormente) ocorreram graças à espectroscopia ótica em alta resolução.

A maior disseminação de teóricos ao longo do país é interpretada como sendo consequências das dificuldades em estabelecer e manter grupos experimentais.

2. Relevância para a Sociedade

2.1. Formação de Pessoal

A interação da Física Atômica e Molecular com outras áreas é uma característica marcante e essencial. Como mencionado em outras partes desse documento há interações de caráter profundo entre essas áreas. Isso se deve a sistemas moleculares serem de interesse, além da Física, na Química, Biofísica, Bioquímica, Farmácia, Física Estatística, Ótica, Ciências dos Materiais, Nanotecnologia, Biotecnologia para citar os casos mais evidentes. Outras possibilidades, ainda mais abrangentes existem, e entre essas, pode-se citar a Gastronomia Molecular, onde se estudam processos químicos relacionados com a

preparação dos alimentos para a manutenção dos nutrientes importantes e Física Atmosférica, onde se estudam processos químicos relacionados com a degradação da camada atmosférica devido à presença de poluentes. Num momento de crescente impacto da população sobre os meios de sobrevivência e a crescente imposição social para qualidade de vida esse tema pode se tornar mais relevante.

De uma maneira geral uma área tem influenciado a outra. Mas possivelmente a maior influência fora da Física, seja a que vem da Química e da Bioquímica. A formação de pessoal tem crescido regularmente e isso pode ser medido em diversas esferas, como a crescente participação nos Encontros Nacionais de Física da Matéria Condensada, organizados pela Sociedade Brasileira de Física. Do ponto de vista da necessidade de pessoal na área, tem havido uma formação combinada (em Física e Química Quântica) de pessoal quase em número suficiente para suprir os desafios mencionados. Isoladamente, a formação na Física deveria crescer e ser incentivada pelo seu extraordinário aspecto multidisciplinar. Análise breve dos doutorados concluídos na área de Física Atômica e Molecular mostra uma capacidade de crescimento de cerca de 50% nos próximos anos. Seria altamente salutar que aumentasse a interação com grupos de excelência no exterior, tanto no nível de doutorado quanto de pós-doutorado. Certamente a área teria também muito a contribuir para a formação de professores de ciências, disseminadores importantes do interesse científico em qualquer sociedade. Nesse sentido, é também muito importante incentivar a formação de pessoal para atividades experimentais e de instrumentação científica.

2.2. Desenvolvimento científico e tecnológico

A área de Física Atômica e Molecular pode naturalmente ajudar o desenvolvimento científico e tecnológico sustentável por se debruçar sobre sistemas moleculares vitais para a existência e preservação da vida. Além de tentar entender os mecanismos envolvidos em temas de meio-ambiente, ciclos de oxigênio, proteção solar por absorção de moléculas, desenvolvimento de fármacos com possível utilização de moléculas naturais e de interesse regional, é possível o *design* de sistemas moleculares por encomenda. A facilidade e desenvolvimentos ocorridos na síntese orgânica permitem a formação de sistemas

moleculares que sejam candidatos a formar novos materiais funcionais. Essa engenharia molecular vem ocorrendo no que se intitula físico-química supramolecular, uma área essencialmente iniciada pelo Prêmio Nobel (1987) Jean-Marie Lehn. As modelagens moleculares tem um papel vital nessa direção e contribuem para o design e formação de dispositivos e sensores na escala nanométrica, que se espera poder revolucionar a produção industrial nos próximos anos. As simulações reduzem custos associados a experimentações desnecessárias e às vezes danosas ao ecossistema.

Sistemas moleculares tem níveis quantizados de energia numa região ampla do espectro de frequências de radiação eletromagnética, desde micro-ondas até o infravermelho, visível e ultravioleta. Com processos envolvendo elétrons em camada profunda é também possível acessar a região de raios-X. Essa característica facilita a utilização de moléculas para o desenvolvimento de sensores e dispositivos.

Novas técnicas óticas têm sido utilizadas em problemas de saúde e em terapia fotodinâmica que são motivo de grande interesse por seu potencial de aplicações em curas ou alívio de tumores. Sistemas organometálicos tem se mostrado muito promissores no tratamento de câncer. Corantes moleculares são vitais para os processos envolvidos em terapia fotodinâmica. Esse tipo de estudos requer a participação de pessoal de várias áreas além da medicina, como a física, a química e a biologia.

O laboratório Nacional de Luz Síncrotron abriga importantes grupos realizando pesquisas moleculares em diferentes níveis. Dentre essas, além de grupos que trabalham com caracterização de sistemas biológicos há outros produtivos grupos de pesquisa estudando espectroscopia de fotoionização de sistemas moleculares variados, incluindo fotoionização de amino-ácidos. Está em planejamento o estudo de fotoionização de sistemas moleculares em fase líquida. Recentemente criado, o Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol, tem como missão central o desenvolvimento de fontes renováveis de energia através do bioetanol de cana-de-açúcar, e lidará com importantes desafios moleculares. Entre esses, a desconstrução cuidadosa do material lignocelulósico (da cana-de-açúcar) em açúcares fermentáveis para produção de etanol. Ferramentas como hidrólise ácida, hidrólise enzimática, plasmas químicos, entre outras, podem ser utilizadas para esta finalidade. A escolha e aplicação da melhor estratégia exige um conhecimento

profundo de todas as etapas de desconstrução, alicerçados pelas bases da Física Atômica e Molecular.

2.3. Impacto na economia

Estudos na área de Física Atômica e Molecular podem contribuir enormemente no processo de Desenvolvimento e Inovação Tecnológica, desde os avanços conseguidos em laboratório de novas instrumentações até o design de produtos (sensores, marcadores, fármacos, cosméticos de proteção e recuperação). Só para mencionar um exemplo, a L'Oréal investiu em 2010 cerca de 650 milhões de euros no desenvolvimento científico associado aos seus produtos cosméticos. No Brasil se utiliza muito pouco a capacidade já instalada nas universidades que poderia contribuir mais para a inovação tecnológica. Isso é verdade também em outros temas, como instrumentos de precisão e no desenvolvimento de software computacional.

Como discutido na seção anterior os sistemas moleculares podem participar de tecnologia na escala nanométrica, e ter também forte impacto na indústria farmacêutica, de alimentos e cosmética. Um aspecto interessante de mencionar é que propriedades moleculares associadas a sistemas isolados podem não apresentar as mesmas características em meio solvente (água por exemplo). Isso é essencial para entender as estruturas de amino-ácidos e pode ser estudado teóricamente com relativo sucesso através de simulação computacional, tendo grande redução com os custos de desenvolvimentos de novos materiais. A indústria farmacêutica carece de conhecimentos adicionais para o desenvolvimento de novas drogas e processos de transporte de drogas (*drug delivery*). Nesse caso torna-se imperativo entender os efeitos hidrofóbicos e assim propriedades do meio aquoso, essencial em processos biológicos.

A espectroscopia molecular tem sido largamente utilizada no estudo da concentração de poluentes nas grandes áreas urbanas. Isso é feito usando-se métodos que possibilitam medir, ao longo do dia e de forma imediata, as variações de gases como NO₂, O₃, SO₂ e outros. Este tipo de análise ambiental tem impacto indireto na economia, pois propicia uma medida da qualidade do ar nos grandes centros e pode servir como parâmetro

para qualidade de vida e prevenção de doenças do trato respiratório nas grandes concentrações urbanas.

Finalmente deve ser enfatizado que estudos moleculares importantes e pioneiros podem ajudar na manutenção da liderança brasileira nos projetos de energia renováveis como estabelecidos pela missão do Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol.

3. Infraestrutura

A parte teórica envolvida nessa área necessita primordialmente de bons recursos computacionais. A revolução ocorrida, tanto em hardware como em software, foi muito importante no grande desenvolvimento recente da área teórica de Física Atômica e Molecular. É fato que hoje todos os grupos atuantes têm, de uma forma ou outra, acesso a recursos computacionais que permitem, talvez com alguma limitação, o desenvolvimento de seu trabalho. Por outro lado, e associado a isso, o progresso é muito rápido e sistemas atuais hoje serão obsoletos, ou pouco competitivos em um futuro próximo. Assim torna-se necessário a criação de um sistema competitivo e flexível. Por essa razão, parece que a criação de clusters computacionais tem sido preferida em comparação com a antiga idéia de *mainframes*. Por outro lado, considerando que as dificuldades computacionais crescem fortemente com o tamanho do sistema molecular (para não mencionar a qualidade dos resultados) esses recursos mostram cedo os seus limites. Isso é uma realidade mundial. Pode ser que a existência de sistemas mistos, com facilidades locais de clusters bem configurados sendo suplementadas com acesso a sistemas de computação de alto desempenho, seja uma solução a ser considerada.

No que se refere à pesquisa experimental, existe um bom parque de equipamentos mas nota-se uma concentração muito grande em regiões específicas do país, notadamente na região Sudeste. Mas há também desigualdades dentro da própria região sudeste. Seria importante a disseminação de recursos experimentais em outras regiões que além de permitir o fortalecimento das pesquisas nessas regiões, seria também um incentivo para o surgimento de interesse na parte experimental. Outros pontos importantes que devem ser ressaltados são a necessidade de manutenção de equipamentos existentes, e uma melhora

nas oficinas de apoio incluindo a criogenia e a vidraria. Para maior agilidade na obtenção de resultados é importante uma melhora na parte logística relacionada com os mecanismos de importação de equipamentos e insumos básicos. As tentativas existentes de melhorar os processos de importação infelizmente não obtiveram o sucesso esperado e tão necessário. Ainda, condições de estabilidade na rede elétrica podem comprometer decisivamente experimentos que devem ser conduzidos ininterruptamente por semanas e até meses. Neste caso, a infraestrutura que deveria ser oferecida pelas instituições de pesquisa, não é tão simples de ser implantada como uma contrapartida a todos os laboratórios onde há demandas por geradores e no-breaks de dezenas de kVA. Uma política de implantação desta infraestrutura deve ser revista pelos órgão de fomento, para viabilizar pesquisas competitivas no país.

4. Inclusão Social

Física Atômica e Molecular está no berço da criação da Física Moderna e poderia ter uma maior participação no esclarecimento da sociedade sobre temas de extrema relevância atual. Como exemplos temos o funcionamento da atmosfera e seu papel na preservação e proteção do ambiente na Terra, o funcionamento de ciclos da vida, funcionamento e importância de relógios atômicos, importância e anomalias físicas e químicas da água, e como isso nos afeta diretamente. Ademais certamente pode contribuir para a formação e atualização de professores, desenvolvimento de projetos científicos de laboratórios e de computação científica. É parte do Regimento da Área a atribuição de auxiliar na organização de cursos que contribuam para a melhoria do ensino da matéria nos cursos de física e química em todo o país.

Por se tratar de uma área com múltiplas possibilidades de aplicações, ela lida com um grande potencial de gerar novos empregos no setor industrial e pode lidar com os importantes desafios dos Laboratórios Nacionais como o de Luz Síncrotron (LNLS) e de Bioetanol (CTBE), esse último sendo estratégico para a liderança brasileira nessa área de energias renováveis.

5. Recomendações

1) É essencial uma maior formação interdisciplinar

Pelas características multidisciplinares da área, como discutido ao longo desse documento, uma recomendação importante seria a aproximação das diferentes áreas temáticas em novos currículos de graduação e de pós graduação. Essa, na realidade, é uma tendência mundial. Nas áreas de ciências é essencial uma melhor formação interdisciplinar. No caso da física ressurte-se de uma melhor formação em química e biologia (ou bioquímica). Uma maior mobilidade entre os pesquisadores destas áreas deveria ser incentivada, promovendo assim uma maior interseção entre as diferentes sub-áreas.

2) É fundamental o fortalecimento de colaborações internacionais

Há alguns anos o Brasil interrompeu o seu forte e bem sucedido programa de bolsas de doutorado no exterior. Esse programa foi muito importante na formação de nossos doutores num momento de poucos quadros atuantes no país. Mas deve ser acentuado que ele também serviu para a aproximação com fortes grupos de pesquisa no exterior. Mais recentemente, até o incentivo para o cumprimento de programas de pós graduação parece ter diminuído. É essencial o fortalecimento de colaborações internacionais com os grandes centros de pesquisa no mundo. Iniciativas, como os convênios internacionais de cooperações entre as agências de fomento brasileiras e agências de outros países importantes, deveriam ser ainda mais promovidas, inclusive envolvendo as fundações regionais (FAPs).

3) É fundamental o incentivo para formação de novos pesquisadores experimentais

Diante do atual quadro de ampla e dominante formação de pesquisadores na área teórica é fundamental o incentivo para a formação de novos pesquisadores experimentais, melhorando a relação teórico/experimental. Isso pode ser realizado através de incentivos pelos órgãos de fomento para atividades experimentais. Uma parcela dessa responsabilidade pode também estar localizada na baixa formação científica oferecida pelos cursos de nível médio que, além de deficientes em geral, raramente incluem experimentos

científicos em seus conteúdos programáticos. Deve ser dado incentivo para os jovens se interessarem pela área experimental e atentar para os laboratórios que geralmente sofrem de falta de manutenção, baixa renovação de material, pouca verba para material de consumo e pouca, ou quase inexistente, infra-estrutura técnica.

4) *Recomenda-se a criação ou preservação de uma política de apoio ininterrupto aos pesquisadores ativos cientificamente*

É evidente que a prática de ciência competitiva requer disponibilidade de financiamentos sem interrupções, além de uma política de manutenção de equipamentos. Assim, recomenda-se a criação ou preservação de uma política de apoio ininterrupto aos pesquisadores ativos cientificamente, através de bolsas de pesquisa, fomento para pesquisa e maior possibilidade de locomoção no país ou para o exterior.

5) *Recomenda-se a nucleação de grupos teóricos e experimentais nas diferentes regiões do país*

Finalmente, embora existam pesquisadores ativos nessa área em todas as regiões do país, o mesmo não ocorre se o foco for colocado na parte experimental. A facilidade de equipamentos para o desenvolvimento de física teórica tem sido o incentivo para a criação de novos grupos de pesquisa em regiões menos favorecidas economicamente. Recomenda-se portanto a nucleação de grupos teóricos e experimentais nas diferentes regiões com incentivo para as regiões com menos recursos humanos em atividade científica. A formação de Centros Regionais fortes, com agregação de pesquisadores experimentais e teóricos, certamente poderia alavancar a área de Física Atômica e Molecular para um nível ainda maior de excelência.

São Paulo, 02 de maio de 2011

Carlos Eduardo Fellows
José David Manguera Vianna
José Rachid Mohallem
Maria Cristina Andreolli Lopes
Sylvio R A Canuto (Coordenador)